Yazar:Muzaffer Enes Yünlü

Tarih:19 Haziran 2026

Spin–Yörünge Torku ile Sürülen Antiferromanyetik Yakınlık Etkisi Üzerinden Bükülmüş İki Boyutlu Moire Süperörgülerinde Elektriksel Olarak Anahtarlanabilir Topolojik Faz Geçişi

Teorik Model Çalışması — Spintronik ve Moire Fiziği Arayüzü (Sürüm 2)

ÖZET

Bükülmüş iki boyutlu Van der Waals heteroyapılarında (sihirli açılı çift katmanlı grafen ve geçiş metali dikalkojenitleri) oluşan düz bantların (flat bands), komşu bir antiferromanyetik (AFM) yalıtkan katmandan kaynaklanan yakınlık değişimi (proximity exchange) etkisine karşı olağanüstü duyarlı olduğu öne sürülmektedir. Bu çalışmada, Spin–Yörünge Torku (SOT) ile elektriksel olarak sürülen AFM Néel vektörünün yönelimi ile Moire bandının topolojik karakteri (Chern sayısı C) arasında doğrudan bir köprü kuran analitik bir model geliştirilmektedir. Sürüm 1'den farklı olarak, modele açıkça bir Kane-Mele tipi spin-yörünge etkileşimi (SOC) terimi dahil edilmiş; bu sayede topolojik faz sınırı artık keyfi bir θN = 90° varsayımıyla değil, malzemeye özgü, bağımsız ölçülebilir iki enerji ölçeğinin (λ_SOC ve λex) oranından türetilen θN* = arccos(λ_SOC/λex) kritik açısıyla tanımlanmaktadır. Önerilen "SOT Kontrollü Moire Topolojik Anahtarı", harici bir akım darbesiyle Néel vektörünü düzlem-içi ile düzlem-dışı yönelimler arasında anahtarlayarak, sistemi topolojik olarak trivial (C=0, ya da Z2-anlamda nötrivial bir QSH durumu) ile topolojik olarak nötrivial (C≠0, QAH-benzeri) fazlar arasında geri-dönüşümlü biçimde geçirebilmektedir. Model, oda sıcaklığı süperiletkenliği gibi spekülatif iddialardan bağımsız olarak, gerçekçi aday malzemelerin (CrSBr, $MnPS_3$) Néel sıcaklıklarına dayanan nicel bir kriyojenik çalışma aralığı (T_op ≲ 40–65 K) öngören, tamamen elektriksel kontrol edilebilen bir platform tanımlamaktadır.

---

1. Giriş

Sihirli açılı bükülmüş çift katmanlı grafende (Magic-Angle Twisted Bilayer Graphene, MATBG) gözlenen düz bantlar, elektronların gerçek uzayda güçlü biçimde lokalize olmasına yol açar. Bu lokalizasyon, sistemi hem güçlü elektron-elektron korelasyonlarına hem de dışarıdan uygulanan yerel manyetik pertürbasyonlara karşı son derece duyarlı hale getirir. Öte yandan, spintronik alanındaki spin-yörünge torku (SOT) teknikleri, ağır metal/antiferromanyet arayüzlerinde Néel vektörünün saf elektriksel akımla, harici manyetik alana ihtiyaç duymadan döndürülebildiğini göstermiştir. Bu çalışmanın temel önerisi, bu iki bağımsız fiziksel olgunun — Moire düz bantları ve SOT-sürümlü AFM dinamiği — bir Van der Waals yığını içinde dikey olarak istiflenmesiyle, Moire bandının topolojik karakterinin elektriksel olarak anahtarlanabilir hale getirilebileceğidir.

Bu yaklaşım, literatürde CrI_3/grafen ve CrSBr/geçiş metali dikalkojeniti gibi heteroyapılarda gözlenen yakınlık değişimi etkilerinin doğal bir uzantısı olarak görülebilir; buradaki yenilik, statik bir ferromanyetik katman yerine, akımla dinamik olarak yönlendirilebilen bir AFM katman kullanılmasıdır. Sürüm 1'deki model, bu fikri yalnızca bir yakınlık-değişim (exchange) terimiyle ifade etmekteydi; aşağıda göstereceğimiz gibi bu, zaman-tersinmezliğini kırmak için yeterli olsa da, *topolojik* bir kütle açmak için tek başına yeterli değildir — bunun için modele açıkça bir spin-yörünge etkileşimi terimi eklenmesi gerekmektedir (bkz. Bölüm 2.3 ve 3). Bu ekleme, hem modelin iç tutarlılığını sağlamakta hem de literatürde grafen/antiferromanyetik-yalıtkan sistemlerinde kuantum anormal Hall (QAH) durumunun gerçekleştirilmesi için zaman-tersinmezliği kırılması ile spin-yörünge etkileşiminin *birlikte* gerekli olduğunu gösteren önceki çalışmalarla (örn. grafen/$BiFeO_3$ heteroyapısı üzerine yapılan ilk-ilkelerden çalışmalar) doğrudan örtüşmektedir.

---

2. Model Hamiltoniyeni

Sistemi dört bileşenin toplamı olarak tanımlıyoruz: Moire düzlemindeki korelasyonlu elektronları tanımlayan bir genelleştirilmiş Hubbard terimi, AFM katmandan kaynaklanan yakınlık değişimi terimi, Kane-Mele tipi bir spin-yörünge etkileşimi terimi ve SOT'un Néel vektörü üzerindeki sürücü etkisi:

```
H = H_Moire + H_AFM-prox + H_SOC + H_SOT
```

2.1. Moire Hubbard Terimi

Düz bant rejiminde elektronlar, Moire periyodikliğine sahip bir örgü üzerinde sıkı-bağ (tight-binding) yaklaşımıyla tanımlanır:

```
H_Moire = −Σ⟨i,j⟩,σ t_ij c†_iσ c_jσ + U Σ_i n_i↑ n_i↓
```

Burada t_{ij} Moire süperörgüsündeki etkin tünelleme genliğini, U ise yerel Coulomb itme enerjisini temsil eder. Sihirli açıda ($\theta \approx 1.1°$) t etkin olarak çok küçülür ve bant genişliği W meV mertebesine iner; bu da sistemi yerel pertürbasyonlara karşı aşırı duyarlı kılan temel nedendir.

2.2. Antiferromanyetik Yakınlık Değişimi Terimi

AFM katmanın Moire düzlemine etkisi, konuma bağlı bir Zeeman-benzeri yakınlık alanı olarak modellenir:

```
H_AFM-prox = Σ_i λex(r_i) S_i · n̂(r_i)
```

Burada S_i = ½ c†_iα σ_αβ c_iβ yerel elektron spin operatörü, n̂(r_i) AFM Néel vektörünün birim yönü, ve λex(r) yakınlık değişim genliğidir. Üst AFM katman ile alt Moire örgüsü arasındaki bükülme uyuşmazlığı nedeniyle λex(r) kendisi de Moire periyodikliği taşır:

```
λex(r) = λ_0 Σ_{j=1}^{3} cos(G_j · r)
```

burada G_j Moire ters örgü vektörleridir. Bu modülasyon, yakınlık etkisinin Moire hücresinin bazı bölgelerinde (örn. AA-istifleme noktalarında) güçlenip diğerlerinde (AB/BA bölgelerinde) zayıflamasına yol açar.

Önemle belirtilmelidir ki bu terim, spin uzayında S_i·n̂ biçiminde bir Zeeman-tipi alan olarak işlediğinden, tek başına zaman-tersinmezliğini kırsa da Dirac konisinde *topolojik* bir kütle açmaz; yalnızca spin-yukarı/spin-aşağı bantlarını enerjide kaydırır. Moire hücresinin AA/AB bölgelerindeki bu modülasyon, faz geçişinin mikroskobik kaynağını oluşturur, fakat geçişin Chern sayısına dönüşmesi için aşağıdaki spin-yörünge terimiyle birleşmesi gerekir.

2.3. Spin-Yörünge Etkileşimi Terimi (Kane-Mele Tipi)

Modele, literatürdeki grafen/TMD ve grafen/AFM-yalıtkan QAH önerileriyle tutarlı biçimde, açık bir spin-yörünge etkileşimi terimi ekliyoruz:

```
H_SOC = λ_SOC Σ_{i,τ} τ s_z(i) σ_z(i)
```

Burada τ = ±1 vadi (valley) indeksi, s_z spin-z operatörü, σ_z ise alt-örgü (sublattice) pseudospin operatörüdür. Bu terim, ya Moire katmanının kendi içsel spin-yörünge etkileşiminden (MATBG'de zayıf) ya da altta yatan ağır metal/TMD katmanlarından kaynaklanan proksimite-indüklenmiş spin-yörünge etkileşiminden (örn. grafen/WSe_2 arayüzlerinde gözlenen Rashba ve valley-Zeeman bileşenleri, bkz. Bölüm 4) ileri gelebilir. Bu terimin varlığı, Bölüm 3'te göstereceğimiz üzere, H_AFM-prox'un saf bir Zeeman yarılmasından gerçek bir topolojik kütleye dönüşmesi için *gereklidir*.

2.4. SOT Sürücü Terimi ve Néel Vektörü Dinamiği

Néel vektörünün zaman evrimi, spin-transfer torku içeren Landau-Lifshitz-Gilbert-Slonczewski (LLGS) tipi bir denklemle tanımlanır:

```
dn̂/dt = −γ n̂ × H_eff + α (n̂ × dn̂/dt) + τ_SOT(j_s)
```

Burada γ jiromanyetik oran, α Gilbert sönüm katsayısı, ve τ_SOT arayüzden enjekte edilen spin akımı yoğunluğu j_s ile orantılı damping-benzeri ve alan-benzeri tork bileşenlerinin toplamıdır. Yarı-statik (adiabatik) rejimde, yani SOT anahtarlama süresinin Moire elektronlarının karakteristik zaman ölçeğinden çok daha uzun olduğu durumda, n̂ sabit bir açı parametresi (θN, φN) ile karakterize edilebilir ve bu, 3. bölümdeki Chern sayısı hesabını analitik olarak izlenebilir kılar.

---

3. Topolojik Faz Geçişi: Chern Sayısının Néel Açısına ve Spin-Yörünge Etkileşimine Ortak Bağımlılığı

K ve K' Moire-Dirac noktaları yakınında, H_AFM-prox ve H_SOC terimlerinin ortak etkisi her bir (vadi τ, spin s) sektörü için ayrı bir kütleli Dirac Hamiltoniyeni üretir:

```
H_τ,s(q) = ħv_F(τ q_x σ_x + q_y σ_y) + Δ_τ,s σ_z
```

Burada etkin kütle terimi iki bağımsız katkının toplamıdır:

```
Δ_τ,s = τ·s·λ_SOC + s·λex·cos(θN)
```

Bu ifadenin fiziksel kökeni şudur: n̂'nin düzlem-dışı bileşeni n_z = cos(θN), S_z ile çarpılır ve spin-uzayında köşegen (diagonal) bir terim olarak σ_z kütlesine doğrudan eklenir. n̂'nin düzlem-içi bileşenleri (S_x, S_y ile

çarpılan kısımlar) ise spin uzayında köşegen-dışıdır; bunlar σ_z kütlesine katkı yapmazlar, bunun yerine spin-yukarı ve spin-aşağı sektörlerini birbirine karıştırarak Kane-Mele durumunu koruyan spin korunumunu kısmen bozar ve kenar kanallarını zayıflatır. Bu ayrım, Sürüm 1'de örtük biçimde atlanmış, ancak modelin iç tutarlılığı için zorunludur.

Her Dirac konisinin Berry eğriliği standart biçimde

```
Ω_τ,s(k) = −τ·s·Δ_τ,s · ħ²v_F² / [2(ħ²v_F²k² + Δ_τ,s²)^(3/2)]
```

şeklinde yazılır ve Brillouin bölgesi üzerinden integre edildiğinde her sektöre C_τ,s = ½·sgn(Δ_τ,s) katkısı verir. Toplam Chern sayısı dört sektörün (iki vadi × iki spin) toplamıdır:

```
C(θN) = ½ Σ_{τ=±1, s=±1} sgn(Δ_τ,s)
```

Kritik açı: θN = 90°'de cos(θN) = 0 olur ve Δ_τ,s = τ·s·λ_SOC kalır — bu, tam olarak zaman-tersinmez bir Kane-Mele/kuantum spin Hall (QSH) durumudur: C = 0, fakat spin-Chern sayısı genel olarak sıfırdan farklıdır (yani sistem "trivial" değil, Z2-anlamda topolojik nötrivial bir QSH fazındadır). Gerçek C = 0 ↔ C ≠ 0 geçişi, Δ_τ,s'nin işaret değiştirdiği açıda gerçekleşir:

```
θN* = arccos(λ_SOC / λex)
```

Bu ifade, Sürüm 1'deki "θN = 90° civarında keskin geçiş" varsayımının yerini alır ve bu varsayım yalnızca λ_SOC → 0 limitinde geçerlidir. λ_SOC ve λex'in her ikisi de bağımsız olarak ölçülebilir nicelikler olduğundan (bkz. Bölüm 4), θN* doğrudan test edilebilir, malzemeye özgü bir öngörüye dönüşmektedir — bu, modelin önemli bir iyileştirmesidir.

Mekanizmanın gözlemlenebilir olması için, hem λ_SOC hem de λex'in Moire bant genişliği W ile karşılaştırılabilir mertebede olması gerekir (λex ≳ W, λ_SOC ≳ W). MATBG'de W tipik olarak birkaç meV mertebesindedir (~1–5 meV); bu nedenle gerçekçi bir gerçekleştirme için ya zayıf-bağlı (θ ≈ 1.1°) Moire bandı ya da güçlü yakınlık eşleşmesi sağlayan ince (tek-katmanlı) bir AFM/SOC ara-katman gereklidir. Bölüm 4'te göstereceğimiz üzere, analog malzeme sistemlerinden elde edilen deneysel veriler bu koşulun fiziksel olarak makul olduğuna işaret etmektedir.

---

4. Önerilen Cihaz Mimarisi: SOT Kontrollü Moire Topolojik Anahtarı

Önerilen yapı dört katmandan oluşur: (i) ağır metal taban elektrot (örn. Pt veya W, SOT akımının enjekte edildiği katman), (ii) ince film AFM yalıtkan (örn. CrSBr veya $MnPS_3$ benzeri bir Van der Waals AFM), (iii) sihirli açılı bükülmüş çift katmanlı grafen veya TMD Moire heteroyapısı, ve (iv) üst hBN kapsülleme katmanı. Çalışma prensibi şu şekildedir:

1. Taban elektrottan düzlem-içi bir akım darbesi (j_c) uygulanır.

2. Bu akım, spin-Hall etkisiyle dikey bir spin akımına (j_s) dönüştürülür ve AFM katmana enjekte edilir.

3. SOT, Néel vektörünü n̂'i düzlem-dışından düzlem-içine (veya tersine) döndürür.

4. Moire katmanındaki etkin kütle terimi $\Delta_{\tau,s}(\theta N)$ değişir; θN, θN^* eşiğini geçtiğinde bant yapısı topolojik olarak trivial $\leftrightarrow$ nötrivial arasında anahtarlanır.

5. Bu geçiş, kenar durumu (edge state) iletkenliğinde veya anormal Hall direncinde (ρxy) keskin bir sıçrama olarak elektriksel şekilde okunur.

Bu mimarinin temel avantajı, anahtarlama işleminin tamamen elektriksel olması ve harici manyetik alana ihtiyaç duymamasıdır — bu da onu manyetik alan gerektiren önceki Moire manyetizma kontrol önerilerine kıyasla pratik cihaz entegrasyonu açısından üstün kılar.

4.1. Enerji Ölçeklerinin Gerçekçiliği: Malzeme Savunması

Doğrudan MATBG/CrSBr veya MATBG/$MnPS_3$ arayüzü için ölçülmüş bir λ_0 veya λ_{SOC} değeri literatürde henüz bulunmamaktadır; bu açık bir soru olarak kalmaktadır (bkz. Bölüm 5). Ancak analog sistemlerden elde edilen bağımsız deneysel ve ilk-ilkelerden veriler, önerilen enerji rejiminin fiziksel olarak makul olduğuna işaret etmektedir:

- **Yakınlık değişim genliği (λ_{ex}):** Grafen/$BiFeO_3$ arayüzünde ilk-ilkelerden hesaplamalarla bulunan yakınlık-indüklenmiş değişim alanı ~70 meV mertebesindedir; grafen/$RbMnCl_3$ heteroyapısında bu değer ~280 meV'e ulaşmaktadır. Her iki değer de MATBG bant genişliği W (~1–5 meV) ile karşılaştırıldığında bir ila iki büyüklük mertebesi daha büyüktür.

- **Spin-yörünge bileşeni (λ_{SOC}):** Grafen/WSe_2 heteroyapılarında, birbirinden bağımsız deneysel tekniklerle (zayıf anti-lokalizasyon, balistik manyetik odaklama, STM kuazi-parçacık girişim görüntülemesi) tutarlı sonuçlar elde edilmiştir: Rashba bileşeni 7–18 meV aralığında, valley-Zeeman bileşeni 1–3 meV aralığında rapor edilmiştir. Bu değerler de W ile aynı mertebede veya üzerindedir.

Her iki enerji ölçeği de kendi ayrı malzeme ailelerinde W'yi aşacak büyüklükte gösterilmiş olduğundan, λex ≳ W ve λ_SOC ≳ W koşullarının *birlikte* sağlanması spekülatif değil, fiziksel olarak gerekçelendirilebilir bir hedeftir. Eksik olan, bu iki etkinin CrSBr veya $MnPS_3$ tabanlı tek bir Van der Waals yığınında eşzamanlı ve toplamsal olarak gerçekleştiğinin doğrudan gösterilmesidir (bkz. Bölüm 5, Açık Soru 1).

4.2. Termal Kararlılık ve Çalışma Sıcaklığı

Cihazın işlevsel olması için üç bağımsız termal kriterin birlikte sağlanması gerekir:

(a) AFM düzenin varlığı: T_op < T_N gereklidir; ancak T_N'ye yakın bölgede ıraksayan kritik manyon dalgalanmaları, SOT-kilitli Néel açısının kararlılığını bozar. Spintronik bellek literatüründeki standart güvenlik payını ödünç alarak: T_op ≲ 0.5·T_N.

(b) SOT-kilidinin makrospin kararlılığı: STT/SOT-MRAM literatüründeki termal kararlılık faktörü doğrudan uygulanabilir: Δ = K_an·V/(k_B T_op) ≳ 40–60 (K_an: anizotropi enerji yoğunluğu, V: anahtarlanan AFM hacmi); bu, Néel açısının termal olarak rastgele sıçramaması için gerekli koşuldur.

(c) Topolojik gap'in termal olarak çözülebilirliği: Chern fazının taşımada gözlenebilmesi için k_B T_op ≪ Δ_gap(θN=0) = min(λ_SOC, λex) olmalıdır; pratikte kararlı plato gözlemleri için Δ_gap/(k_B T_op) ≳ 10 kuralı kullanılır.

Aday malzemeler için bu kriterler şu sayısal sonuçları verir:

- **CrSBr** (T_N ≈ 132 K): (a) kriteri T_op ≲ 66 K verir.
- **$MnPS_3$** (T_N ≈ 78 K): (a) kriteri T_op ≲ 39 K verir.

(b) ve (c) kriterleri, λ_SOC'nin Bölüm 4.1'de tartışılan ~10 meV mertebesindeki değerlerinde tipik olarak (a)'dan daha gevşektir; dolayısıyla belirleyici sınır genellikle Néel sıcaklığından kaynaklanır. Sonuç olarak, önerilen anahtarın gerçekçi çalışma sıcaklığı aralığı **kriyojenik rejimde (T_op ≲ 40–65 K)** kalmaktadır. Oda sıcaklığı çalışması mevcut malzeme verisiyle desteklenmemektedir; bu, modelin temel ve açıkça kabul edilmesi gereken bir sınırlamasıdır.

---

5. Tartışma ve Sınırlamalar

Bu model bilinçli olarak ölçülü bir iddia taşımaktadır: oda sıcaklığı süperiletkenliği gibi termodinamik olarak çok zorlayıcı bir hedef yerine, mevcut deneysel araçlarla (Moire fabrikasyonu ve SOT spintroniği, her ikisi de ayrı ayrı laboratuvar ortamlarında rutin biçimde gerçekleştirilmektedir) ulaşılabilir, dar kapsamlı ama somut bir topolojik anahtarlama fonksiyonelliği önermektedir. Sürüm 2'de modelin iç tutarlılığı (H_SOC teriminin eklenmesi) ve nicel sınırları (kritik açı ve çalışma sıcaklığı) güçlendirilmiş olsa da, üç önemli açık soru kalmaktadır:

1. **Eşzamanlı malzeme doğrulaması:** λex ve λ_SOC için Bölüm 4.1'de sunulan değerler farklı malzeme ailelerinden (grafen/AFM-oksit ve grafen/TMD) gelmektedir. Bu iki etkinin CrSBr veya $MnPS_3$ tabanlı *tek bir* MATBG yığınında eşzamanlı, toplamsal ve W ile rekabet edecek büyüklükte gerçekleştiğinin doğrudan deneysel veya ilk-ilkelerden (ab-initio) doğrulanması gerekmektedir.

2. **Kriyojenik sınırlama:** Bölüm 4.2'de türetilen termal kriterler, çalışma sıcaklığını $T_{op} \lesssim 40–65$ K aralığına sınırlamaktadır (aday malzemenin Néel sıcaklığına bağlı olarak). Bu, cihazın oda sıcaklığında değil, kriyostat gerektiren bir rejimde çalışacağı anlamına gelir ve modelin bir sonraki versiyonunda daha yüksek T_N'li Van der Waals AFM adaylarının (henüz keşfedilmemiş veya az çalışılmış) araştırılması gerekebilir.

3. **Tam bant yapısı hesabı gereksinimi:** Bölüm 3'teki türetim, düşük-enerji efektif Dirac teorisi düzeyindedir ve λ_SOC ile λex(r)'nin Moire periyodikliğiyle (G_j modülasyonu) k-uzayında tam Berry eğriliği üzerindeki birleşik etkisini içermemektedir. Chern sayısı geçişinin gerçek keskinliği ve θN* tahmininin doğruluğu, sürekli model + tight-binding simülasyonuyla tam bant yapısı hesabıyla doğrulanmalıdır.

---

6. Sonuç

Bu çalışmada, Moire süperörgülerindeki düz bantların elektronik lokalizasyonu ile SOT-sürümlü antiferromanyetik Néel vektörünün dinamik kontrol edilebilirliğini birleştiren bir "SOT Kontrollü Moire Topolojik Anahtarı" önerilmiştir. Sürüm 1'e kıyasla, model artık açık bir spin-yörünge etkileşimi terimi içermekte, topolojik faz sınırını keyfi bir açı yerine malzemeye özgü, ölçülebilir bir kritik açı ($\theta N^* = \arccos(\lambda_{SOC}/\lambda_{ex})$) ile tanımlamakta ve çalışma sıcaklığını spintronik literatüründen ödünç alınan nicel termal kararlılık kriterleriyle ($T_{op} \lesssim 40–65$ K) sınırlandırmaktadır. Önerilen mekanizma, Moire bandının topolojik karakterini (Chern sayısı) tamamen elektriksel bir akım darbesiyle anahtarlamayı amaçlamaktadır. Bu yaklaşım, Moire fiziği ile spintronik arayüz mühendisliğini birleştiren, deneysel olarak test edilebilir, dürüstçe sınırları çizilmiş bir sonraki adım sunmaktadır.

Not: Bu belge, kullanıcı ile yürütülen teorik bir tartışma sürecinin ürünü olan kavramsal bir model taslağıdır; deneysel doğrulama veya hakemli yayın süreci içermemektedir.